

Prévision de la géométrie des molécules : méthode VSEPR

I. Intérêt et principe

VSEPR : Répulsion des Paires Electroniques des Couches (Shell) de Valence.

Intérêt : la méthode VSEPR permet de **prévoir la géométrie des molécules** à partir de la représentation de LEWIS.

Principe : les différentes paires d'électrons, liées ou libres (paires de valence ou paires non-liantes), de la couche externe de valence d'un atome se repoussent entre elles.

II. Molécules à un atome central

On considère les molécules de type AX_nE_p , où :

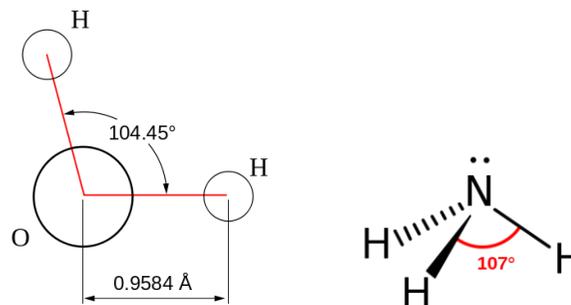
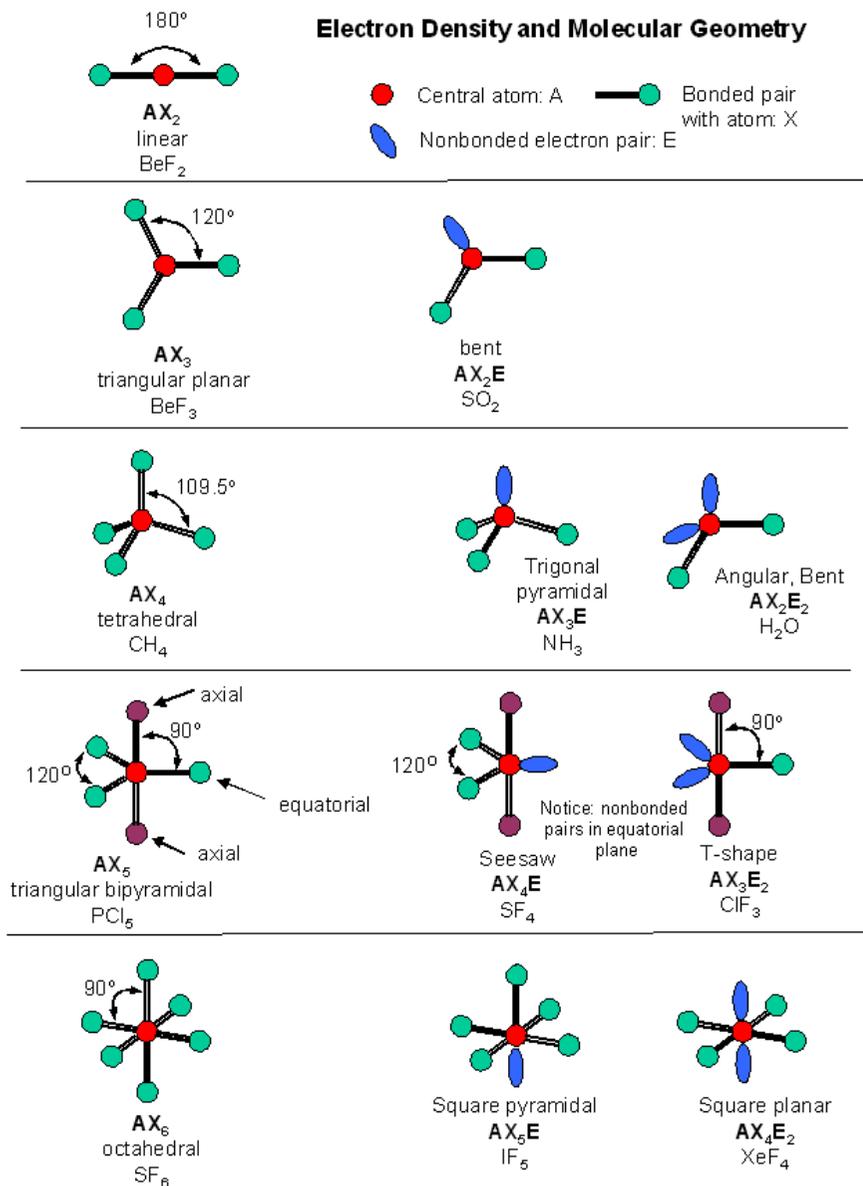
- **A** est l'**atome central** lié aux **atomes X** par **n liaisons simples** ;
- **A** possède en outre **p doublets** non liants.

Pour ces molécules, la géométrie est fonction de la somme $n + p$, car l'on considère que les **paires liantes et non liantes** participent à la structure.

n+p	2	3	4	5	6
Type d'environnement de l'atome central	Digonal	Trigonal	Tétraédrique	Pentagonal	Octaédrique
Géométrie de la molécule	Linéaire	Plane (coudée ou triangulaire)	Pyramidale ou coudée	Bipyramide à base triangulaire pour $p = 0$	Bipyramide à base carrée pour $p = 0$

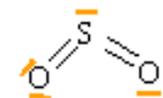
Les schémas ci-dessous illustrent les différentes géométries obtenues pour différentes valeurs de n et p, ainsi que quelques exemples de molécules présentant ces géométries.

Electron Density and Molecular Geometry



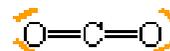
La molécule d'ammoniac est pyramidale ; comme l'atome d'ammoniac porte un doublet non liant, les angles HNH sont inférieurs à 109.5°. La molécule d'eau est plane, coudée, et comme l'atome O porte deux doublets non-liants, l'angle HOH est inférieur à 107°.

Dans le tableau ci-contre, la molécule de SO₂ apparait comme AX₂E. Elle possède en fait deux doubles liaisons :



structure de LEWIS de SO₂

Les doubles liaisons se comportent comme des simples liaisons dans la théorie VSEPR, à ceci près qu'une liaison double prend « plus de place » qu'une liaison simple (et donc une liaison triple qu'une liaison double). Par exemple, la molécule de dioxyde de carbone est linéaire :



III. Molécules à plusieurs atomes centraux

Chaque atome « central » est à considérer séparément des autres ; son environnement donne la géométrie « locale » ; puis on recompose la structure complète avec les différents fragments :

C'est le cas de la molécule d'hydrazine où chaque atome d'azote a un environnement tétraédrique :

